

$$n = \int_{r_1 - \Delta r_1}^{r_1 + \Delta r_1} W(r) dr \quad (1)$$

где r_1 точка, соответствующая первому максимуму функции $W(r)$, и $r_1 - \Delta r_1$, $r_1 + \Delta r_1$ точки пересечения $W(r)$ с осью r слева и справа от r_1 .

Для веществ, содержащих более одного сорта атомов, например 3, нужно учитывать их относительное количество в химической формуле C_i и относительные рассеивающие способности этих атомов K_i . Тогда формула (1) должна быть заменена формулой [7]:

$$Q_1 = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 C_i K_i K_j n_{ij} \quad (2)$$

где n_{ij} число атомов сорта "j" около одного атома сорта "i", C_i и K_i описаны выше, Q_1 - площадь под первым максимумом на кривой радиального распределения атомов данного вещества $W(r)$.

Нами была разработана программа для расчета парциальных координационных чисел по формуле (2). Ниже приводятся результаты по определению параметров ближнего порядка в пленках соединений системы $Yb-As-S$ (Se, Te), полученные с помощью этой программы.

Исходя из межатомных расстояний, полученных нами из КРРА для соединений системы $Yb-As-S$ (Se, Te) [8-10], установлено, что ионы иттербия находятся во второй координационной сфере атомов мышьяка, т.е. $n_{12} = n_{21} = 0$. Кроме того, одноименные атомы не являются ближайшими соседями в структуре аморфных соединений системы $Yb-As-S$ (Se, Te) т.е. $n_{11} = n_{22} = n_{33} = 0$. Из этих условий мы исходили при определении парциальных координационных чисел в вышеуказанных соединениях. В данной работе использованы следующие обозначения: 1-Yb, 2-As, 3-S, Se, Te.

Аморфное соединение $YbAs_4S_7$. Расчет парциальных координационных чисел аморфного $YbAs_4S_7$ проводили при следующих данных по относительному содержанию, рассеивающим способностям и площади под первым максимумом на КРРА аморфного $YbAs_4S_7$: $K_{Yb} = 2,000$; $K_{As} = 1,098$; $K_S = 0,625$; $C_{Yb} = 0,08$; $C_{As} = 0,34$; $C_S = 0,58$; $Q_1 = 4,60$ - площадь под первым максимумом на КРРА аморфного $YbAs_4S_7$.

Для этого соединения найдены следующие парциальные координационные числа: $n_{13} = 2$, $n_{23} = 3$, $n_{32} = 2$, $n_{31} = 4$, $n_{11} = n_{22} = n_{12} = n_{21} = n_{33} = 0$. Набор $n_{13} = 2$, а $n_{12} = 0$ означает, что ближайшим окружением иона Yb^{2+} является 2 атома серы. Для атома мышьяка

ка $n_{23} = 3$, а $n_{21} = 0$, т.е. около одного атома мышьяка находятся 3 атома серы. Для атомов серы найдено координационное число 6: $n_{32} + n_{31} = 6$ ($2As + 4Yb^{2+}$).

Аморфное соединение $YbAs_2S_4$. Для $YbAs_2S_4$ эффективные рассеивающие способности и относительное количество каждого из рассматриваемых элементов следующие: $K_{Yb} = 1,89$; $K_{As} = 1,03$; $K_S = 0,59$; $C_{Yb} = 0,14$; $C_{As} = 0,29$; $C_S = 0,57$. Площадь под первым максимумом на КРРА аморфного $YbAs_2S_4$ равна 2,92. Нами получены следующие парциальные координационные числа для аморфного $YbAs_2S_4$: $n_{11} = n_{12} = n_{22} = n_{21} = n_{33} = 0$; $n_{13} = 2$; $n_{32} = 1$; $n_{31} = 3$ что означает, что около иона Yb^{2+} находятся 2 атома серы. Отличительной чертой координационных чисел аморфного соединения $YbAs_2S_4$ является то, что $n_{23} = 2$, а не 3, как в аморфном As_2S_3 . Это означает, что в структуре аморфного $YbAs_2S_4$ происходит изменение структурной сетки и положения одного из трех атомов серы относительно их положения в структуре аморфного As_2S_3 .

Аморфное соединение $YbAs_4Se_7$. Исходные данные для расчета парциальных координационных чисел в аморфном $YbAs_4Se_7$ следующие: $C_{Yb} = 0,09$; $C_{As} = 0,33$; $C_{Se} = 0,58$; $K_{Yb} = 1,666$; $K_{As} = 0,904$; $K_{Se} = 0,912$. Площадь под первым координационным максимумом на КРРА аморфного соединения $YbAs_4Se_7$ равна 3,56.

Для аморфного $YbAs_4Se_7$ найдены следующие парциальные координационные числа; $n_{11} = n_{22} = n_{33} = n_{12} = n_{21} = 0$; $n_{13} = 3$; $n_{32} = 3$; $n_{31} = 1$. Таким образом, в аморфных пленках $YbAs_4Se_7$ около Yb^{2+} иона находятся 3 атома селена, других атомов около иона Yb^{2+} в аморфном $YbAs_4Se_7$ нет.

Аморфное соединение $Yb_3As_4Se_9$. Начальные условия для расчета парциальных координационных чисел в аморфном $Yb_3As_4Se_9$ следующие: $C_{Yb} = 0,19$; $C_{As} = 0,25$; $C_{Se} = 0,56$; $K_{Yb} = 1,53$; $K_{As} = 0,829$; $K_{Se} = 0,824$. Площадь под первым координационным максимумом равна 3,20.

Для аморфного $Yb_3As_4Se_9$ найдены следующие парциальные координационные числа: $n_{11} = n_{12} = n_{22} = n_{21} = n_{33} = 0$; $n_{13} = 3$; $n_{23} = 4$; $n_{32} = 1$; $n_{31} = 2$, т.е. около иона Yb^{2+} в аморфном $Yb_3As_4Se_9$ находятся 3 атома селена, также, как в аморфном $Yb_3As_4Se_7$.

Аморфное соединение $YbAs_2Te_4$. При определении координационных чисел в аморфном $YbAs_2Te_4$ мы исходили из следующих данных: $C_{Yb} = 0,14$; $C_{As} = 0,29$; $C_{Te} = 0,57$; $K_{Yb} = 1,319$; $K_{As} = 0,714$; $K_{Te} = 1,031$. Площадь под первым максимумом на КРРА аморфного $YbAs_2Te_4$ равна 4,51. Для аморфного $YbAs_2Te_4$ най-

дены следующие парциальные числа: $n_{11} = n_{12} = n_{22} = n_{21} = n_{33} = 0$; $n_{13} = 3$; $n_{23} = 2$; $n_{32} = 1$; $n_{31} = 4$. Таким образом, в аморфном $YbAs_2Te_4$ иттербий окружен 3 атомами теллура.

Аморфное соединение $YbAs_4Te_7$. Для этого соединения: $K_{Yb} = 1,245$; $K_{As} = 0,706$; $K_{Te} = 1,094$; $C_{Yb} = 0,09$; $C_{As} = 0,33$; $C_{Te} = 0,58$. Площадь под первым максимумом на КРРА аморфного $YbAs_4Te_7$ равна 2,66.

В этом соединении найдены следующие парциальные координационные числа: $n_{11} = n_{22} = n_{33} = n_{12} = n_{21} = 0$; $n_{31} = 3$; $n_{23} = 1$; $n_{31} = 2$. Это означает, что в аморфном $YbAs_4Te_7$ около иона иттербия находятся 3 атома теллура.

Анализируя координационные числа в аморфных соединениях системы $Yb-As-S(Se,Te)$ можно видеть, что для всех исследованных нами соединений этих систем, координационное число иттербия либо 2, либо 3, причем, во всех случаях ближайшими соседями иттербия являются атомы халькогена. Для атомов мышьяка такого постоянства для координационных чисел не наблюдается, они меняются от 1 у $YbAs_4Te_7$ до 4 у $Yb_3As_4Se_9$. Для атомов халькогена также наблюдается разброс в координационных числах, однако, около атомов халькогена, в отличие от атомов мышьяка, есть атомы как мышьяка, так и иттербия, а полное координационное число у атомов халькогена меняется от 3 у $YbAs_4Te_7$ и $Yb_3As_4Se_9$ до 6 у $YbAs_4S_7$ и $Yb_3As_4S_9$.

В работах [11, 12] изучена структура кристаллического соединения $Eu_3Sb_4Se_9$ в массивном состоянии и показано, что минимальное координационное число у Eu равно 6. Наши данные показывают, что тригональные призмы с РЗЭ в центре, которые наблюдаются для $Eu_3Sb_4Se_9$ и других кристаллических тройных соединений с РЗЭ, в пленках аморфных структур, изученных нами, претерпевают искажения, в результате которых ион иттербия смещается ближе к трем атомам халькогена. Этим, по-видимому, объясняется то, что для аморфных структур системы $Yb-As-S(Se,Te)$ для окружения РЗЭ, в данном случае Yb^{2+} , нами получены координационные числа 2 и 3, причем, все ближайшие к иттербию атомы являются атомами халькогена.

Литература

1. Золотухин И.В. Физические свойства аморфных металлических материалов. М. Металлургия, 1986, с.176.
2. Рустамов П.Г., Алиев О.М., Курбанов Т.Х. Тройные халькогениды редкоземельных элементов. Баку, Элм, 1981, с.214.
3. Балакиши В.И., Парыгин В.И., Чирков Л.Е. Физические основы акустооптики. М., Радио и связь, 1985, с.278.
4. Займан Дж. Модели беспорядка. М., Мир, 1982, с.592.
5. Скрышевский А.Ф. Рентгенография жидкостей. Изд-во Киевского Университета, Киев, 1966, с.123.

6. *Татаринова Л.И.* Структура твердых аморфных и жидких веществ. М., Наука, 1983, с.150.

7. *Юрченко Р.Я.* Электрографическое исследование ближнего порядка аморфных веществ с использованием новой методики нормирования. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физ.-мат.наук, Львов, 1982, с.177.

8. *Эфендиев Э.Г., Гаджиев Э.Ш.* Определение ближнего порядка в аморфных пленках $Yb_3As_4Se_9$. Препринт №371 Института Физики АН Азербайджана, Баку, 1990, с.8.

9. *Эфендиев Э.Г., Гаджиев Э.Ш., Шафизаде Р.Б.* Ближний порядок в аморфных полупроводниковых пленках $YbAs_2S_4$ и $YbAs_4S_7$. Тезисы докладов I Всесоюзного симпозиума "Методы дифракции электронов в исследовании структуры веществ" Москва, 1991, с.38.

10. *Efendiyev E.G., Hajiyev E.Sh.* J.Non-Crystalline Solids, 1993, v.163, p.29-37.

11. *Гасымов В.А., Мусаев С.И., Гусейнов Г.Г.* Кристаллическая структура и электрофизические свойства $Eu_3Sb_4S_9$. Тезисы докладов II Всесоюзной конференции по физике и химии РЗЭ, Тбилиси 1983, с.64-65.

12. *Lemoine P., Carre D., Guittard M.* Acta Crystallography, 1981, B37, n.6, p.1281-1284.

E.Q. Əfəndiyev, R.Ə. Əli-zadə, E.Ş. Hacıyev

Yb-As-S (Se, Te) AMORF BİRLƏŞMƏLƏRİ SİSTEMİNDƏ PARSİAL KOORDİNASİYA ƏDƏDLƏRİ.

Yeni amorf materiallar sinfini təşkil edən tərkibində nadir torpaq elementləri olan, amorf birləşmələri üçün parsial koordinasiya ədədləri hesablanmışdır. Göstərilmişdir ki, tədqiq olunmuş bütün amorf birləşmələri üçün Yb^{2+} -in ən yaxın qonşusu halkogen atomlarıdır.

E.G. Efendiyev, R.A. Ali-zade, E.Sh. Hajiyev

PARTIAL COORDINATIONAL NUMBERS IN AMORPHOUS COMPOUNDS OF *Yb-As-S (Se, Te)*

The partial coordinational numbers have been determined in compounds of *Yb-As-S (Se, Te)* systems. This class of amorphous materials represent a new class of amorphous materials, containing rare earth elements. We established, that there are only atoms of sulphur near Yb^{2+} ions for all investigated materials.